

TOPAS como ferramenta didática para a compreensão da interação de partículas carregadas pesadas

TOPAS as a didactic tool for understanding heavy charged particle interactions

Tomás F.D.C. de Vasconcelos^{1,2}, Luiz A.R. da Rosa¹, Simone C. Cardoso^{*2} 

¹Instituto de Radioproteção e Dosimetria, Programa de Pós-Graduação em Radioproteção e Dosimetria, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

²Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Recebido em 23 de outubro de 2025. Revisado em 14 de janeiro de 2026. Aceito em 17 de fevereiro de 2026.

A Física das Radiações é um tópico fundamental para a Física Médica. Com o avanço tecnológico de anos recentes, surgiu a possibilidade de aprimorar e atualizar as metodologias de ensino nos ambientes acadêmicos. A simulação de Monte Carlo é uma ferramenta que pode trazer benefícios para estudantes que buscam aprofundar seus conhecimentos, sendo especialmente útil para avaliar o transporte de partículas na matéria. O objetivo deste trabalho é utilizar o código TOPAS (*TOol for PArticle Simulation*) na implementação de simulações didáticas com foco em interação de partículas carregadas pesadas com a matéria. As simulações escolhidas avaliam os efeitos de heterogeneidade do meio e energia das partículas no alcance dos feixes de radiação. Os resultados mostram que a presença de uma fina camada de osso é capaz de diminuir o alcance de um feixe de prótons em água e que é possível fazer previsões do alcance de um feixe a partir da energia e da massa das partículas. Para fins didáticos, as simulações desenvolvidas demonstram o potencial do uso de ferramentas computacionais como o TOPAS no ensino da Física Médica, possibilitando a visualização de fenômenos complexos e a compreensão mais intuitiva das interações entre radiação e matéria.

Palavras-chave: Física Médica, Física das Radiações, Monte Carlo, TOPAS, Partículas Pesadas.

Radiation Physics is a fundamental subject in Medical Physics. With recent technological advances, there has been great improvement in teaching methodology in the academic environment. Monte Carlo simulations, being especially useful in evaluating particle transport through matter, is an example of activities that can be beneficial to students who wish to deepen their knowledge. The objective of this work is to use TOPAS (Tool for Particle Simulation) for didactic simulations, focusing on heavy charged particle interactions. The simulations presented evaluated the effects of target heterogeneity and particle energy in the radiation beam ranges. The results show that a thin layer of bone can reduce the range of protons in water and that it's possible to make predictions on range based on the beam's particle energy and mass. The simulations show the didactic potential of tools such as TOPAS in teaching Medical Physics, making it possible to visualize complex phenomena and providing a more intuitive comprehension of beam-target interactions.

Keywords: Medical Physics, Radiation Physics, Monte Carlo, TOPAS, Heavy Particles.

1. Introdução

O estudo da Física das Radiações é essencial para qualquer profissional que busca envolvimento com a Física Médica. Para cursos de graduação com o objetivo de formar físicos médicos, disciplinas que abordam esse assunto devem ser o marco principal do ciclo profissionalizante. Grandezas dosimétricas, transporte de energia e interações da radiação com a matéria são exemplos de tópicos que um físico médico, de qualquer área que deseje se especializar, precisa ter conhecimento sólido. Portanto, é recomendável que o ensino dessa disciplina considere a natureza prática da profissão.

Atividades que busquem atrair a atenção dos alunos para um maior engajamento, incitando uma maior interação e familiarização com os conceitos abordados na teoria são sempre bem-vindas em um ambiente acadêmico. A grande versatilidade do método de Monte Carlo – podendo ser usado tanto como ferramenta de pesquisa acadêmica como em ambientes clínicos como suporte às ferramentas de cálculo de dose – é uma vantagem que, bem explorada, promete um avanço no ensino de Física das Radiações.

Diversos códigos podem ser utilizados para realizar as simulações [1–5] e existem trabalhos na literatura que propõem a utilização destes códigos como suporte ao ensino de Física Médica [6–11], mas requerem conhecimento prévio de programação para implementação da ferramenta.

*Endereço de correspondência: simone@if.ufrj.br

Editor-Chefe: Marcello Ferreira 

O TOPAS (TOol for PArTicle Simulation) [12, 13] é um código gratuito, baseado no Geant4, um dos códigos de Monte Carlo mais conhecidos. Com uma arquitetura de simples instalação em sistemas Linux, o TOPAS oferece funcionalidades eficazes para reproduzir fielmente simulações de qualquer tipo na Física Médica, tendo sido validado para feixes clínicos de prótons no Massachusetts General Hospital [14]. Por possuir uma barreira de entrada relativamente baixa, não pressupondo conhecimento de linguagens de programação como C++, o TOPAS se mostra bastante acessível para o uso acadêmico.

Neto e colaboradores [15] forneceram uma linha de base para o uso do TOPAS (*TOol for PArTicle Simulation*) [12, 13]. O trabalho focou em cenários para avaliar a influência do número de histórias, tamanho do campo de irradiação, meios homogêneos e heterogêneo para feixe de fótons, além de feixes incidentes de diferentes naturezas (fótons e elétrons).

A motivação deste artigo é continuar esses esforços direcionados ao ensino de Física das Radiações por meio de simulações didáticas conforme proposto por Neto e colaboradores [15]. O objetivo do presente trabalho é propor simulações didáticas utilizando o código TOPAS para estudar a interação de partículas carregadas com o meio, apresentando os parâmetros necessários para a sua implementação. Foram avaliados os alcances de feixes de partículas carregadas pesadas em diferentes condições. As simulações permitem observar a influência dos principais fatores que afetam o alcance das partículas no meio absorvedor, sendo considerados, para o feixe de radiação, a energia cinética e a massa das partículas, e, para o meio absorvedor, a presença de heterogeneidades.

2. Fundamentação Teórica

O comportamento de um feixe de radiação, por meio da forma como a radiação deposita energia no meio absorvedor, pode ser avaliado através do perfil da dose depositada ao longo da profundidade do meio. Experimentalmente, são inseridos dosímetros em certas regiões do material absorvedor, adquirindo a dose pontualmente ao longo do eixo de irradiação. Quando a curva de dose em profundidade obtida é normalizada para uma dose ou profundidade específica, damos a ela o nome de Percentual de Dose em Profundidade (PDP).

Diferente de feixes de fótons e de elétrons, feixes de partículas carregadas pesadas depositam a maior parte de sua energia na profundidade máxima de alcance das partículas. Conforme as partículas carregadas interagem com o meio absorvedor e perdem energia, a quantidade de energia perdida por unidade de caminho percorrido aumenta até que a partícula chegue ao repouso. Pico de Bragg é o nome que se dá ao ponto de dose máxima na parte distal da curva de deposição de dose em profundidade para partículas carregadas pesadas [16].

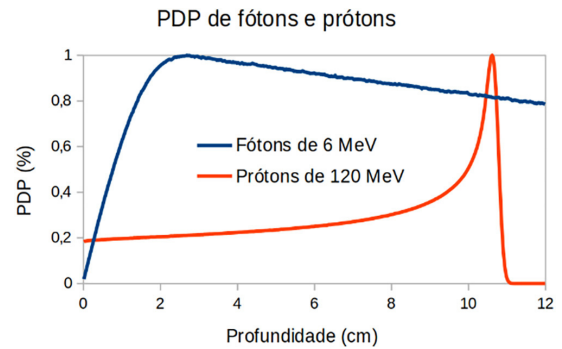


Figura 1: Curvas de Percentual de Dose em Profundidade (PDP) para fótons e prótons em água. Ambas as curvas foram normalizadas para 100% na dose máxima. Dados obtidos de simulações no TOPAS com 10^7 histórias para o feixe de fótons e 10^6 para o de prótons.

A Figura 1 mostra a diferença entre a deposição de dose decorrente de dois feixes monoenergéticos em água, um de fótons de 6 MeV e outro de prótons de 120 MeV. Podemos ver que a dose depositada pelos elétrons produzidos pelo feixe de fótons decresce lentamente, sendo esse decréscimo considerável a profundidades maiores; já a dose depositada pelos prótons rapidamente torna-se nula após o pico de Bragg.

Para entender a deposição de dose de um feixe de partículas carregadas, pode ser vantajoso pensar em como cada partícula interage individualmente com o meio. Pode-se definir quatro tipos de interação entre partículas carregadas e átomos: colisões *soft* (colisões moles), colisões *hard* (colisões duras), interações com o campo Coulombiano do núcleo e colisões com o núcleo [17]. Para cada interação, podemos definir um parâmetro de impacto b que a partícula terá com o átomo de raio atômico a e raio nuclear n . A Figura 2 apresenta um esquema de uma partícula prestes a interagir com um átomo.

Chamamos de colisão *soft* ($b \gg a$) aquela em que a partícula interage com o átomo na sua totalidade, depositando pouca energia [17]. Após a interação, o átomo pode continuar no mesmo estado energético, ser

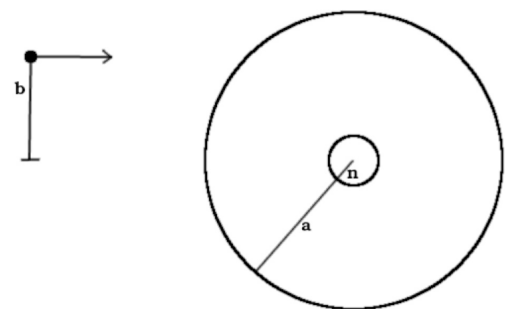


Figura 2: Desenho esquemático simplificado de uma partícula prestes a interagir com um átomo, onde b é o parâmetro de impacto, a é o raio atômico e n é o raio nuclear. A figura não se encontra em escala realista.

excitado para um estado de maior energia ou pode haver a ejeção de um elétron de valência.

Colisões *hard* ($b \sim a$) são aquelas em que a partícula é capaz de interagir com elétrons de camadas internas, depositando muita energia [17]. Após a interação, o mais provável é que um único elétron fortemente ligado seja ejetado, levando à emissão de raios X característicos ou elétrons Auger para preencher a vacância deixada.

Dizemos que uma partícula interage com o campo nuclear ($b \ll a$) quando ela é espalhada, podendo produzir radiação de frenagem caso o espalhamento seja inelástico (*Bremsstrahlung*) [17]. O espalhamento elástico é menos relevante para o caminho médio percorrido por partículas carregadas pesadas do que por partículas carregadas leves, como elétrons e pósitrons. No caso de partículas carregadas pesadas, *Bremsstrahlung* pode ser desconsiderado nas faixas energéticas referidas neste trabalho.

Por fim, caso a partícula colida com o núcleo ($b < n$) a altas energias, núcleons podem ser ejetados, levando a uma cascata de emissões de partículas de evaporação (núcleons de baixa energia) e raios gama [17]. Para irradiações com íons pesados, as partículas produzidas por interações de colisão nuclear tornam-se mais proeminentes, levando à formação de uma cauda de deposição de dose após o pico de Bragg.

Sabendo como cada partícula interage em determinadas faixas de energia, podemos definir uma energia média perdida por interação com o meio. O *stopping power* (poder de parada) é o valor esperado da energia cinética perdida dT por unidade de comprimento dx que uma partícula percorre em um meio. Dividindo essa grandeza pela densidade do meio (ρ), temos o *stopping power* mássico (1) [17]:

$$S = -\frac{dT}{\rho dx}. \quad (1)$$

A partir do *stopping power* mássico, podemos definir um alcance para as partículas de um feixe. Supondo que a partícula sofra uma perda contínua de energia, que depende de sua energia cinética instantânea e do meio absorvedor, ao longo do caminho percorrido, obtemos um alcance aproximado (R_{CSDA}), em g/cm² (2) [17]:

$$R_{CSDA} = \rho \int_0^R dx = \int_{T_0}^0 \frac{\rho dx}{dT} dT = \int_0^{T_0} S^{-1} dT. \quad (2)$$

Usando a aproximação de Bethe para o *stopping power* é possível definir um alcance R para partículas com velocidade v ; sendo β a razão entre essa velocidade e a velocidade da luz no vácuo. Com isso, podemos determinar uma expressão que relacione o alcance do feixe com a velocidade de suas partículas. Assim, a equação (3), adaptada do Report 49 da ICRU (*International Commission on Radiation Units and Measurements*) [18], fornece uma maneira de prever qual será o alcance $R_2(\beta)$ de um feixe de partículas de massa M_2 e número atômico Z_2 a partir do alcance $R_1(\beta)$ de um feixe de partículas de

massa M_1 e número atômico Z_1 . Isso será válido desde que as partículas tenham a mesma velocidade inicial e que sejam mantidas as condições de feixe e alvo. Para altas energias, como as usadas nas simulações, o fator de correção $F_{corr}(\beta)$ se torna muito próximo de um.

$$\frac{R_2(\beta)}{R_1(\beta)} = \frac{M_2 Z_1^2}{M_1 Z_2^2} F_{corr}(\beta). \quad (3)$$

Podemos determinar o R indiretamente por uma medição de dose absorvida, a partir da profundidade do pico de Bragg. Ao contrário do R_{CSDA} , que não é obtido experimentalmente, R possui uma incerteza que deve ser calculada. Experimentalmente, dosímetros são posicionados nos objetos simuladores para determinação da dose. Em simulações de Monte Carlo, os dosímetros podem apresentar qualquer nível de complexidade, isso inclui o fato de poderem ter o mesmo material do meio em que se encontram. Dosímetros nas simulações também não são limitados em tamanho, podendo ser muito menores do que qualquer dosímetro real, aumentando a resolução da simulação.

Para evitar o uso de vários dosímetros independentes, podemos criar um dosímetro único e dividi-lo em *bins* (intervalos) de mesmo tamanho. Com isso, a resolução da simulação e, consequentemente a incerteza, é dada em relação ao tamanho do *voxel* da geometria de aquisição. Em contrapartida, quanto maior for a resolução da simulação, maior deve ser o número de histórias, que se relaciona com o número de partículas, aumentando a carga computacional e tempo de simulação. Para determinar o alcance do feixe nas simulações foi usada a equação (4), onde R é o alcance, B é o número do *bin* do valor máximo de dose do pico de Bragg e z é o tamanho em centímetros do dosímetro no eixo de irradiação. B é um número que varia de zero a $n - 1$, onde n é o número total de *bins* do dosímetro no eixo de irradiação. Assim, a incerteza, também em centímetros, é dada pela metade do valor de z .

$$R = B \times z + \frac{z}{2}. \quad (4)$$

Esse método de determinação de incerteza é simples e depende unicamente dos parâmetros da simulação. Sua limitação está no fato de que buscar a diminuição da incerteza, por meio do aumento da resolução, acarreta o aumento do número de histórias necessárias à obtenção de uma boa estatística de simulação. Outros métodos, como a realização de um ajuste à curva, podem ser úteis quando o custo computacional adicional não compensa o ganho de resolução.

3. Materiais e Métodos

Todas as simulações foram realizadas utilizando o código TOPAS [12, 13]. A primeira etapa do trabalho objetivou validar os métodos utilizados. A Seção 3.1 lida especificamente com os aspectos das simulações realizadas para a

validação e seus resultados. As seções seguintes abordam os parâmetros de simulação (geometria e feixe).

O código TOPAS disponibiliza uma biblioteca onde estão inseridas as seções de choque que descrevem os processos físicos de interação da radiação com o meio. O usuário pode selecionar as que descrevem melhor os eventos de interesse.

Quanto à geometria, foram utilizados dosímetros ideais e posicionamento de geometrias sem que houvesse sobreposição. Quanto ao feixe, foram especificadas a definição da partícula do feixe, a escolha da energia e a distribuição de posição do feixe. Sintaxe e outras noções básicas do TOPAS não foram abordadas.

A primeira fase de simulações didáticas teve como objetivo mostrar a influência da presença de heterogeneidade no alcance de feixes monoenergéticos de prótons. A segunda fase buscou demonstrar a validade da equação (3) na sua capacidade de previsão. Para prótons e íons ${}^4\text{He}^{2+}$, isso seria possível simplesmente ao aplicar a relação com os valores tabelados de R_{CSDA} . A fim de aumentar o escopo do trabalho, também foram usadas outras partículas nas simulações.

Para uma compreensão completa e uma eventual reprodução das simulações apresentadas, é recomendada a leitura ativa da documentação do TOPAS [12, 13], disponível no site *read the docs* [19]. Nessa documentação são descritos todos os parâmetros que regem as simulações, além de serem disponibilizados todos os códigos-exemplo que o TOPAS fornece. Esses exemplos podem ser simulados imediatamente após a instalação, sendo de grande valia para uma familiarização com o código. O repositório GitHub de um dos autores deste trabalho, com versões das simulações apresentadas, possui um código comentado para uma fácil reprodução dos experimentos [20].

3.1. Validação dos modelos físicos

Os modelos físicos são definidos nas bibliotecas de seção de choque de interação disponíveis, determinando como as partículas interagem com o meio a cada “passo”. São denominados módulos de Física. Os módulos padrão do TOPAS são úteis para várias simulações, mas podem apresentar inconsistências em alguns casos específicos.

Para a primeira fase de simulações foram utilizados os modelos da Física padrão do TOPAS.

Durante a validação da segunda fase foi utilizado, além do padrão, o módulo adaptado *g4em-dna_opt2*. A documentação do Geant4 informa que este módulo trata de interações eletromagnéticas discretas de diversas partículas, incluindo íons ${}^4\text{He}^{2+}$ e todos os íons [21]. A Figura 3 apresenta a lista *MyList* com os módulos usados na aquisição dos dados na segunda fase.

As simulações para a validação dos modelos físicos utilizados para simular feixes de íons ${}^4\text{He}^{2+}$ foram realizadas de modo a comparar o módulo da Física padrão com o adaptado, mantendo todas as outras configurações intactas. As simulações foram realizadas em um mundo

```
5 s:Ph/ListName           = "MyList"
6 b:Ph/ListProcesses      = "False"
7 s:Ph/MyList/Type        = "Geant4_Modular"
8 sv:Ph/MyList/Modules    = 7 "g4em-standard_opt4" "g4h-phy_QGSP_BIC_HP"
   "g4decay" "g4ion-binarycascade" "g4h-elastic_HP" "g4stopping" "g4em-dna_opt2"
9 d:Ph/MyList/EMRangeMin  = 100. eV
10 d:Ph/MyList/EMRangeMax = 5. GeV
```

Figura 3: Lista de Física utilizada no TOPAS para a segunda fase de simulações.

de vácuo, adquirindo a dose absorvida ao longo do eixo de irradiação em uma caixa de água. Para cada energia, de 50 a 800 MeV, foram obtidos os alcances dos feixes de íons ${}^4\text{He}^{2+}$. Os resultados obtidos foram comparados com os tabelados pelo NIST (National Institute of Standards and Technology) [22, 23].

3.2. Geometrias

No TOPAS, as geometrias são definidas a partir do seu tipo. Por exemplo, *TsBox* define uma caixa por meio dos valores de *HLX*, *HLY* e *HLZ*, cada um indicando a metade do tamanho total (*half length*) da caixa no referido eixo. *XBins*, *YBins* e *Zbins* indicam o número de *bins* em que a caixa será dividida em cada eixo. *RotX*, *RotY* e *RotZ* são os parâmetros de rotação e *TransX*, *TransY* e *TransZ*, os de translação da geometria. *TsBox* foi o único tipo de geometria utilizada nessas simulações, por ser o mais simples.

Em uma simulação, a primeira geometria a ser criada é o *World*, o mundo onde acontece o experimento. Assim como qualquer outra *TsBox*, o mundo também possui valores atribuídos de *HLX*, *HLY* e *HLZ*, que indicam as fronteiras da simulação. O mundo pode ser de qualquer material (vácuo, ar, água, ...), de acordo com o objetivo da simulação. Um conceito extremamente importante, e bastante conhecido no meio computacional, é o de nódulos *parent* e *child* (pai e filho). Para se criar uma geometria, deve-se definir sua origem (sua geometria pai); que normalmente é o *World*. Duas geometrias com o mesmo *parent* não podem se sobrepor no espaço, caso contrário, a simulação é abortada.

Para posicionar múltiplas geometrias, pode ser vantajoso usar os próprios parâmetros das estruturas ao invés de números fixos. A Figura 4 apresenta um exemplo de disposição de geometrias no TOPAS em que isso é feito para o parâmetro de translação no eixo z. Dessa forma, os tamanhos das geometrias ao longo do eixo z poderiam ser alterados sem que precisasse ser feita uma correção para evitar possíveis sobreposições ou espaços vazios.

Ao invés de dividir todas as geometrias em vários *bins* para melhorar a resolução do *voxel*, é possível criar geometrias exclusivamente para *scoring* (contabilização). Criar um ou mais dosímetros pode ser útil por diversos motivos. Além de ser possível aproximar os resultados da simulação a valores obtidos experimentalmente, diminuir o número total de *bins* das geometrias reduz consideravelmente o tempo de simulação. A Figura 5 mostra o posicionamento do dosímetro, evidenciando o modo de

```

11 s:Ge/Skull/Type      = "TsBox"
12 s:Ge/Skull/Parent    = "World"
13 #s:Ge/Skull/Material = "G4_WATER"
14 s:Ge/Skull/Material  = "G4_B-100_BONE"
15 d:Ge/Skull/HLX       = 9. cm      #Y rotacionado para X
16 d:Ge/Skull/HLY       = 11. cm     #Z rotacionado para Y
17 d:Ge/Skull/HLZ       = 0.4 cm     #X rotacionado para Z
18 i:Ge/Skull/XBins     = 1
19 i:Ge/Skull/YBins     = 1
20 i:Ge/Skull/ZBins     = 1
21 d:Ge/Skull/RotX      = 180. deg
22 d:Ge/Skull/RotY      = 0. deg
23 d:Ge/Skull/RotZ      = 0. deg
24 d:Ge/Skull/TransX    = 0. cm
25 d:Ge/Skull/TransY    = 0. cm
26 d:Ge/Skull/TransZ    = Ge/Brain/HLZ + Ge/Skull/HLZ cm
27
28 s:Ge/Brain/Type      = "TsBox"
29 s:Ge/Brain/Parent    = "World"
30 s:Ge/Brain/Material  = "G4_WATER"
31 d:Ge/Brain/HLX       = 9. cm      #Y rotacionado para X
32 d:Ge/Brain/HLY       = 11. cm     #Z rotacionado para Y
33 d:Ge/Brain/HLZ       = 6. cm      #X rotacionado para Z
34 i:Ge/Brain/XBins     = 1
35 i:Ge/Brain/YBins     = 1
36 i:Ge/Brain/ZBins     = 1
37 d:Ge/Brain/RotX      = 180. deg
38 d:Ge/Brain/RotY      = 0. deg
39 d:Ge/Brain/RotZ      = 0. deg

```

Figura 4: Exemplo de disposição de geometrias no TOPAS feito para o parâmetro de translação z na linha 26. Note que é possível alterar o material da geometria *Skull* simplesmente comentando uma das linhas 13 ou 14, alterando a composição do fantoma entre homogênea e heterogênea.

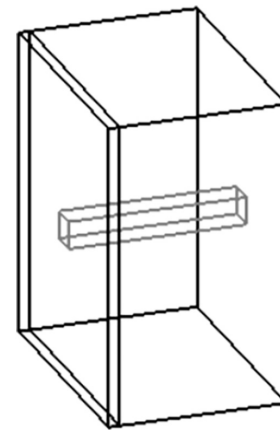


Figura 6: Visualização gráfica pelo TOPAS das geometrias de exemplo das Figuras 4 e 5. É possível ver as duas geometrias do material absorvedor, ambas em branco, e o dosímetro, em cinza.

geometrias (*Skull* e *Brain*) apresentadas na Figura 4; em cinza, a geometria de *scoring* (*Dosimeter*) apresentada na Figura 5. O dosímetro se estende ao longo de todo o fantoma. Mesmo que todas sejam geometrias filhas do *World*, não há conflito por sobreposição.

3.3. Feixe

Depois de definidas as geometrias da simulação, é preciso escolher a fonte de radiação. Por exemplo, uma fonte chamada *ParticleSource* posicionada com o componente de geometria *BeamPosition* a 100 cm da superfície de uma geometria chamada *Water*. No TOPAS, é possível escolher as partículas de um feixe de íons a partir do número de prótons Z , do número de massa A e da carga efetiva Q do núcleo, como mostra a Figura 7.

O parâmetro *BeamPositionDistribution*, definido como uma Gaussiana, caracteriza uma entrega no eixo central mais quente do que as bordas, de acordo com o parâmetro *BeamPositionSpread* para x e y , que determina o desvio padrão da Gaussiana. Um feixe paralelo

```

41 s:Ge/Dosimeter/Type  = "TsBox"
42 s:Ge/Dosimeter/Parent = "World"
43 b:Ge/Dosimeter/IsParallel = "True"
44 d:Ge/Dosimeter/HLX   = 1. cm
45 d:Ge/Dosimeter/HLY   = 1. cm
46 d:Ge/Dosimeter/HLZ   = 6.4 cm
47 i:Ge/Dosimeter/XBins = 1
48 i:Ge/Dosimeter/YBins = 1
49 i:Ge/Dosimeter/ZBins = 512
50 d:Ge/Dosimeter/RotX  = 180. deg
51 d:Ge/Dosimeter/RotY  = 0. deg
52 d:Ge/Dosimeter/RotZ  = 0. deg
53 d:Ge/Dosimeter/TransX = 0. cm
54 d:Ge/Dosimeter/TransY = 0. cm
55 d:Ge/Dosimeter/TransZ = Ge/Skull/HLZ cm

```

Figura 5: Parâmetros de definição de um dosímetro ideal no TOPAS. Ao invés de possuir um material específico, o dosímetro não entra em conflito com outras geometrias por estar em um “mundo paralelo”, como indicado na linha 43.

fazê-lo tomar para si o material do volume onde está inserido, ou seja, de torná-lo um dosímetro ideal.

A Figura 6 mostra a disposição das geometrias usadas na primeira fase de simulações pela visualização gráfica do TOPAS. É possível visualizar os contornos de três geometrias: em branco, a combinação das duas

```

71 s:Ge/BeamPosition/Parent = "World"
72 s:Ge/BeamPosition/Type   = "Group"
73 d:Ge/BeamPosition/TransX = 0. m
74 d:Ge/BeamPosition/TransY = 0. m
75 d:Ge/BeamPosition/TransZ = Ge/Water/HLZ + 100. cm
76 d:Ge/BeamPosition/RotX   = 180. deg
77 d:Ge/BeamPosition/RotY   = 0. deg
78 d:Ge/BeamPosition/RotZ   = 0. deg
79
80 s:So/ParticleSource/Type  = "Beam"
81 s:So/ParticleSource/Component = "BeamPosition"
82 s:So/ParticleSource/BeamParticle = "GenericIon(Z,A,Q)"
83 d:So/ParticleSource/BeamEnergy  = X MeV

```

Figura 7: Parâmetros de definição das partículas de um feixe de íons. Além de íons genéricos, pode-se escolher fótons (“*gamma*”), elétrons (“*e-*”) ou outras partículas, cada uma de acordo com seu nome específico.

```

85 s:So/ParticleSource/BeamPositionDistribution = "Flat"
86 #s:So/ParticleSource/BeamPositionDistribution = "Gaussian"
87 s:So/ParticleSource/BeamPositionCutoffShape = "Ellipse"
88 d:So/ParticleSource/BeamPositionCutoffX = 0.25 cm
89 d:So/ParticleSource/BeamPositionCutoffY = 0.25 cm
90 #d:So/ParticleSource/BeamPositionSpreadX = 0.1 * So/
ParticleSource/BeamPositionCutoffX cm
91 #d:So/ParticleSource/BeamPositionSpreadY = 0.1 * So/
ParticleSource/BeamPositionCutoffY cm

```

Figura 8: Parâmetros de definição de um feixe paralelo cilíndrico.

cilíndrico pode ser definido de acordo com a Figura 8. O parâmetro *BeamPositionCutoff* representa, para x e y, a e b de uma elipse.

3.4. Simulações

As energias usadas nas simulações variam de 70 a 150 MeV para prótons, estando em uma faixa energética compatível com o tratamento de protonterapia. Para a primeira fase das simulações, a comparação dos alcances foi analisada em função das curvas de perfil de dose em profundidade considerando geometrias de aquisição diferentes para uma mesma energia.

Todas as simulações da primeira fase foram feitas usando os módulos da Física padrão em um mundo de vácuo, com os materiais de água e osso sendo definidos, respectivamente, como *G4_WATER* e *G4_B100_BONE*. Com essas geometrias, foram feitos dois fantasmas de mesmo tamanho total, definido a partir de medidas padrão de uma cabeça humana, sendo de $12,8 \times 18 \times 22 \text{ cm}^3$. No fantoma heterogêneo, a camada de osso foi definida como 0,8 cm para simular a espessura média do crânio na lateral da cabeça. A irradiação do feixe se deu ao longo do eixo x. O tamanho do voxel do dosímetro ao longo do eixo x foi definido para ambos os fantasmas como 0,02 cm. Em cada simulação, foram usados feixes circulares planos paralelos com raio de 1 cm com origem posicionada a 100 cm da superfície do fantoma. Para determinar a influência da energia foram usados feixes monoenergéticos de prótons de 70, 100 e 120 MeV, com 10^6 histórias cada.

Para a segunda fase, a comparação de alcances foi feita em relação a partículas com energias diferentes, mantendo-se uma mesma geometria de aquisição simples. A simplicidade dessas simulações permite uma fácil reprodução e, a fim de investigação e aprendizado, um incremento gradual de complexidade. Todas as simulações foram feitas em um mundo de vácuo com os mesmos parâmetros de feixe usados na primeira fase de simulações. Dessa vez, porém, foi usado um único fantoma homogêneo de água, $10 \times 10 \times 40 \text{ cm}^3$. As partículas dos feixes e suas energias foram: prótons de 150 MeV, deuteron de 300 MeV, íons Hélio-4 de 600 MeV e íons Carbono-12 de 1800 MeV. Para todas as partículas, com uma resolução de *voxel* do dosímetro definida como 0,033 cm no eixo de irradiação, 107 histórias foram suficientes para a obtenção de uma estatística confiável.

Como parâmetro de comparação para os alcances obtidos nas simulações, foram usadas as tabelas PSTAR e ASTAR fornecidas pelo NIST [22, 23].

Alguns arquivos de texto que podem ser úteis na verificação das simulações podem ser encontrados no repositório do GitHub de um dos autores [20].

4. Resultados e Discussão

A primeira fase de simulações didáticas teve como objetivo verificar a influência da heterogeneidade a partir dos perfis de dose em profundidade. Os resultados mostram que a presença do osso, de 0,8 cm para simular a espessura média do crânio na lateral da cabeça, afeta o alcance dos prótons. Para prótons de 70, 100 e 120 MeV, o alcance dos feixes diminuiu com a presença da camada de osso. A Figura 9 mostra as curvas de PDP para prótons de 100 MeV, como exemplo desse efeito.

Como pode ser visto na Tabela 1, a maior diferença percentual entre os *Rs* nos fantasmas homogêneo e heterogêneo foi obtida para o feixe de prótons de 70 MeV. Essa diferença, de 3,7 desvios padrões da incerteza, diminui para 1,4 desvios padrões da incerteza para o feixe de 120 MeV, indicando uma menor influência da presença de heterogeneidade para energias mais altas. Isso pode ser entendido pelo fato de que o *stopping power* do material é menor para partículas com maior energia cinética. Levando em conta a perda de energia por colisões na camada de osso, as partículas de maior energia inicial perdem menos energia, comparativamente às de energia menor, antes de entrarem no fantoma de água. Isso faz com que o efeito de redução do alcance seja proporcionalmente maior para feixes de baixa energia, mesmo que a diferença bruta se mantenha por volta de 0,3 cm.

A segunda fase buscou demonstrar a validade da equação (3) na sua capacidade de previsão. Para prótons e íons $^4\text{He}^{2+}$, isso seria possível simplesmente ao aplicar a relação com os valores tabelados de R_{CSDA} .

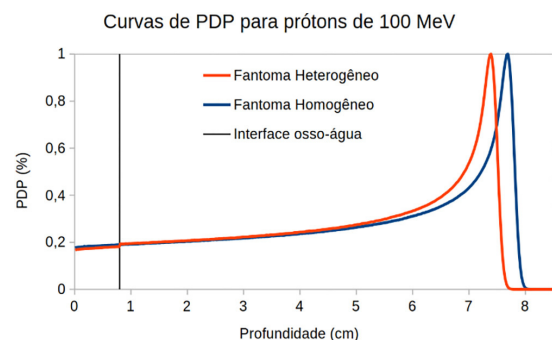


Figura 9: Comparação de Percentual de Dose em Profundidade nos dois fantasmas para prótons de 100 MeV. A linha vertical preta, na profundidade de 0,8 cm, indica a interface osso-água para o fantoma heterogêneo. As curvas foram normalizadas para 100% na dose máxima. Como esperado, a posição do pico de Bragg muda com a presença de heterogeneidade.

Tabela 1: Alcances dos feixes de 70, 100 e 120 MeV nos dois fantasmas. Os valores tabelados pelo NIST para prótons em água líquida foram adicionados para comparação.

Alcance	70 MeV	100 MeV	120 MeV
R_{CSDA} NIST	4,080 g/cm ²	7,718 g/cm ²	10,66 g/cm ²
R no fantoma homogêneo	4,07 ± 0,02 cm	7,67 ± 0,02 cm	10,61 ± 0,02 cm
R no fantoma heterogêneo	3,77 ± 0,02 cm	7,39 ± 0,02 cm	10,31 ± 0,02 cm

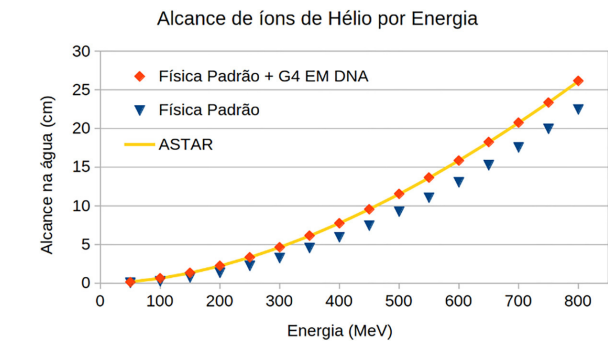


Figura 10: Comparação dos alcances obtidos para a validação da física utilizada na segunda fase de simulações didáticas. Os alcances obtidos usando a física adaptada concordam com a curva amarela, obtida com os valores da tabela ASTAR do NIST.

A Figura 10 compara os alcances obtidos por energia para cada simulação, incluindo a curva dos valores tabelados pelo NIST. Para o feixe de 800 MeV, houve uma diferença de 3,7 centímetros, sendo 16% maior com a física adaptada do que com o módulo de Física padrão. Essa diferença percentual aumenta para baixas energias, sendo três vezes maior para o feixe de 50 MeV. A partir desses resultados, nota-se que o módulo de Física padrão subestima o alcance para feixes de íons $^4\text{He}^{2+}$.

A fim de aumentar o escopo do trabalho, também foram usadas outras partículas nas simulações. Nos testes que realizamos com as outras partículas, não foram observadas diferenças dessa magnitude. Além disso, não houve um aumento considerável no tempo de simulação com a adição desse módulo de Física. Assim, a utilização do modulo adaptado se justifica para a segunda fase por apresentar melhor concordância com os valores tabelados para íons $^4\text{He}^{2+}$.

As simulações para verificação de alcances dos íons mostraram que a equação (3) foi capaz de prever com boa precisão os resultados obtidos. A partir do alcance de prótons, a previsão esperada era que dêuterons tivessem o dobro do alcance, íons $^4\text{He}^{2+}$ tivessem o mesmo alcance e íons Carbono tivessem um terço do alcance. A Figura 11 mostra as curvas de PDP para essas partículas.

Como pode ser visto na Tabela 2, o alcance esperado R_E , previsto pela equação (3) a partir do feixe de prótons, trouxe boas concordâncias com os alcances R obtidos nas simulações. A maior diferença se deu para o feixe de íons $^4\text{He}^{2+}$, sendo de 3,9 desvios padrões da incerteza com um teste Z. Aplicando esse mesmo teste para o R_{CSDA} , temos 1,2 desvios padrões da incerteza

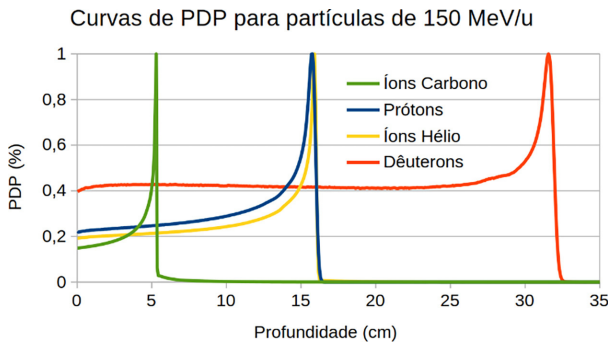


Figura 11: Comparação de Percentual de Dose em Profundidade para feixes de prótons de 150 MeV, dêuterons de 300 MeV, íons Hélio de 600 MeV e íons Carbono de 1800 MeV. As curvas foram normalizadas para 100% na dose máxima.

Tabela 2: Alcances dos feixes da segunda fase de simulações. Os alcances esperados estão relativamente próximos dos resultados obtidos, dada a resolução de voxel e o número de histórias. Os valores de R_{CSDA} tabelados pelo NIST para prótons e íons $^4\text{He}^{2+}$ em água líquida foram adicionados para comparação.

Partícula	T (MeV)	R (cm)	R_E (cm)	R_{CSDA} (g/cm ²)
$^1\text{H}^+$	150	15,767 ± 0,033	—	15,77
$^2\text{H}^+$	300	31,567 ± 0,033	31,54	—
$^4\text{He}^{2+}$	600	15,900 ± 0,033	15,77	15,86
$^{12}\text{C}^{6+}$	1800	5,300 ± 0,033	5,26	—

para íons $^4\text{He}^{2+}$. Isso indica que a diferença observada se dá pela aproximação da fórmula, não pela imprecisão da simulação.

Dada a simplicidade das simulações, o custo computacional requerido é baixo, favorecendo a acessibilidade ao ambiente acadêmico. Quanto mais potente o hardware, menor o tempo de simulação; contudo, até mesmo laptops para uso pessoal são capazes de realizá-las em algumas horas. Uma simulação típica para prótons dura cerca de 5 minutos e, para feixe de Carbono, cerca de 1h20, utilizando um processador 12th Gen Intel Core i7-12700K × 20 com 32 GB RAM e placa de vídeo integrada. Para mostrar a viabilidade em máquinas menos potentes, o tempo de simulação é de 25 minutos para feixes de prótons e 6h para feixe de Carbono utilizando-se um processador 12th Gen Intel Core i3-1215U, com 8 GB RAM e placa de vídeo integrada.

Docentes que se interessarem por implementar o TOPAS em suas aulas – ou estudantes buscando um

aprofundamento por conta própria – podem encontrar todas as informações sobre a instalação no site oficial do código [24].

5. Conclusões

As simulações desenvolvidas demonstraram de forma clara a influência de diferentes fatores sobre o alcance de feixes de radiação. Nas simulações da primeira fase, foram abordados os conceitos de energia do feixe e de presença de heterogeneidade. Nas simulações da segunda fase foi investigado o alcance de feixes de partículas diferentes em meio homogêneo.

Na primeira fase, observou-se que a presença de heterogeneidades, como uma camada de osso, reduz o alcance de feixes monoenergéticos de prótons, especialmente em energias mais baixas. Foi observado que a inclusão da heterogeneidade mais densa causou a diminuição dos alcances dos feixes de prótons. Essa diminuição de alcance se deu proporcionalmente maior para os feixes de menor energia.

Já na segunda fase, verificou-se a validade da relação teórica entre número atômico, massa e alcance para feixes de íons, com resultados em boa concordância com os valores de referência. Foi observado que a maior diferença se deu para o feixe de íons ${}^4\text{He}^{2+}$, dado que os alcances para os feixes de dêuterons e íons Carbono foram compatíveis. A diferença de alcance entre feixes de prótons e íons ${}^4\text{He}^{2+}$ não se mostra somente nos resultados das simulações, também sendo observado na comparação entre os valores tabelados.

As simulações propostas permitiram visualizar, de maneira prática, conceitos fundamentais como o *stopping power* e o pico de Bragg, contribuindo para uma compreensão mais intuitiva das interações entre partículas carregadas e a matéria. Por sua simplicidade e versatilidade, essas atividades se mostram adequadas ao uso didático, favorecendo o aprendizado ativo em Física das Radiações.

Além disso, o método de Monte Carlo, implementado via TOPAS, oferece amplas possibilidades de expansão, permitindo a exploração de novos cenários, materiais e energias, o que reforça seu potencial como ferramenta pedagógica e de pesquisa em Física Médica.

Evidentemente, a introdução de atividades novas no ambiente de ensino traz consigo pontos positivos e negativos. Entre os positivos, está a maior flexibilização do ambiente, permitindo uma interação mais compreensiva entre professores e alunos. O estudo individual, baseado em livros didáticos, é indispensável e insubstituível, mas se torna ineficaz à medida que o rigor matemático começa a comprometer o aprendizado do aluno. Por outro lado, ao implementar essas e outras simulações, os docentes devem se atentar ao nível de interesse de cada aluno individualmente, garantindo que a barreira inicial de aprendizado seja superada e motive o aluno a seguir explorando novos cenários que permitam aprimorar o

aprendizado dos processos físicos envolvidos relacionados à interação da radiação com a matéria.

Devemos ressaltar a importância do docente na escolha das atividades realizadas em sala de aula. O foco do presente trabalho é mostrar a viabilidade do uso do código TOPAS para estudar a interação de partículas carregadas com a matéria em situações relevantes clinicamente e fornecer uma base inicial da Física relevante, além de códigos iniciais que suportam a implementação da ferramenta na disciplina de Física das Radiações ou Física da Radioterapia.

É importante ressaltar que as simulações de Monte Carlo recomendadas nesse trabalho estão atualmente implementadas na disciplina de Física das Radiações II do curso de Graduação em Física Médica da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Disponibilidade de Dados

Todo o conjunto de dados que dá suporte aos resultados deste estudo está disponível mediante solicitação ao autor (tsvasconcelos94@gmail.com).

Referências

- [1] S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. Arce, M. Asai, D. Axen, S. Banerjee, G. Barrand et al., *Detectors and Associated Equipment* **506**, 250 (2003).
- [2] F. Salvat, J.M. Fernández-Varea e J. Sempau, *PENELOPE-2008: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport* (OECD Publishing, Barcelona, 2008).
- [3] T. Goorley, M. James, T. Booth, F. Brown, J. Bull, L.J. Cox, J. Durkee, J. Elson, M. Fensin, R.A. Forster et al., *Nuclear Technology* **180**, 298 (2012).
- [4] S. Jan, G. Santin, D. Strul, S. Staelens, K. Assié, D. Autret, S. Avner, R. Barbier, M. Bardies, P.M. Bloomfield et al., *Physics in Medicine & Biology* **49**, 4543 (2004).
- [5] R.L. Ford, W.R. Nelson, *The Egs Code System: Computer Programs for the Monte Carlo Simulation of Electromagnetic Cascade Showers (Version 3)*, disponível em: <https://www.slac.stanford.edu/pubs/sslacreports/reports03/slac-r-210.pdf>.
- [6] S. Hartikainen, H. Rintala, L. Pylväs e P. Nokelainen, *Education Sciences* **9**, 276 (2019).
- [7] P. Pater, M. Vallieres e J. Seuntjens, *Medical Physics* **41**, 426 (2014).
- [8] H. Yoriyaz, *Revista Brasileira de Física Médica* **3**, 141 (2009).
- [9] W.F. Rebello, E.R. Andrade, M.P.C. Medeiros, R.G. Gomes, A.X. Silva, S.C.A. Correa e E.M. Souza, em: *Simpósio Internacional sobre Educación, Capacitación y Gestión del Conocimiento en Energía Nuclear y sus Aplicaciones* (Cusco, 2015).
- [10] P.C. Justino, S.P. Souza, L.P. Neves, W.S. Santos e A.P. Perini, em: *Anais do XII Simpósio de Engenharia Biomédica – IX Simpósio de Instrumentação e Imagens*

- Médicas* (Uberlândia, 2019). Disponível em: <https://doi.org/10.5281/zenodo.3459937>.
- [11] V. Júnior, O. Tavares, L. Souza, C. Assis, A.P. Perini, W.S. Santos e L.P. Neves, em: *Congresso Brasileiro de Metrologia das Radiações Ionizantes (On-line, 2020)*. Disponível em: <https://cbmri.org.br/site/wp-content/uploads/2020/11/CBMRI-35.pdf>.
- [12] J. Perl, J. Shin, J. Schümann, B. Faddegon and H. Paganetti, *Medical Physics* **39**, 6818 (2012).
- [13] B. Faddegon, J. Ramos-Méndez, J. Schümann, A. McNamara, J. Shin, J. Perl e H. Paganetti, *Physica Medica* **72**, 114 (2020).
- [14] M. Testa, J. Schümann, H.M. Lu, J. Shin, B. Faddegon, J. Perl e H. Paganetti, *Medical Physics* **40**, 121719 (2018).
- [15] R.S.R. Neto, F.M.L. Souza, A.L.E. Fidelis, A.M. Rocha, L.G.O. Santana, L.A.R. Rosa e S.C. Cardoso, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **45**, e20220231 (2023).
- [16] S. Frank e X. Zhu, *Proton Therapy: Indications, Techniques and Outcomes* (Elsevier, Amsterdam, 2020).
- [17] F.H. Attix, *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry* (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2008).
- [18] A. Allisy, A.M. Kellerer, R.S. Caswell, G.E.D. Adams, K. Doi, L. Feinendegen, M. Inokuti, I. Isherwood, J.R. Mallard, H. Paretzke et al., *Journal of the ICRU* **49**, 69 (1993).
- [19] TOPAS, *Welcome to the TOPAS documentation!*, disponível em: <https://topas.readthedocs.io/en/latest/>.
- [20] Meu TCC, disponível em: <https://github.com/tsvas/tcc>.
- [21] *Guide for Physics Lists*, disponível em: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsListGuide/html/index.html>.
- [22] PSTAR, disponível em: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/PSTAR.html>.
- [23] ASTAR, disponível em: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ASTAR.html>, acessado em: 09/10/2024.
- [24] TOPAS, disponível em: <https://www.topasmc.org/>.